



TITLE:

競合相互作用をもつ2次元イジングモデル(強い相関をもつゆらぎの統計物理学(第2回),科研費研究会報告)

AUTHOR(S):

上野, 陽太郎

---

CITATION:

上野, 陽太郎. 競合相互作用をもつ2次元イジングモデル(強い相関をもつゆらぎの統計物理学(第2回),科研費研究会報告). 物性研究 1984, 42(5): 11-16

ISSUE DATE:

1984-08-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91403>

RIGHT:

# 競合相互作用をもつ2次元イジングモデル

東工大理 上野陽太郎

## §1 はじめに

従来主に取扱われてきた臨界現象の肉題は、相互作用の間に競合やフラストレーションがない系で、いわゆる臨界現象の普遍性が成り立つ場合である。それらの系では、スピン連は熱的擾乱に抗して相互作用を解かせ協力し合って基底状態のスピン配列をめやすなけたから、1つの相転移だけが生じる。しかし、相互作用が競合する系では、熱的擾乱、相互作用、スピンの自由度等の役割は規則系に限っても従来の系のように単純なものではない。格子の型にも依存してそれらは互いに影響し合い、一般に複数の多彩な相転移を行う。即ち、不整合(IC)相と整合(C)相の転移である。ゆえに強い2次元の場合には、長距離秩序(LRO)はないが、相肉肉数が距離の1と表わされる相、即ち、floating相(or IC相)が現われる。これらの相は最近発表している吸着層の肉題で特に研究されているので、詳しい内容については斯波氏と斎藤氏の発表を参照されたい。

ここでは理論的興味から競合相互作用をもつ2次元スピン系を取り扱う。最近フラストレーションモデルである三角格子反強磁性IsingモデルにおいてKosterlitz-Thouless型の相転移が見出されたが、この系の相互作用を異方的にした場合には、より一般的モデルとしての競合相互作用系になる。これ以外に、異方的next nearest neighbor (ANNNI)モデルとその等方的モデル(INNNIモデル)を考える。

ここではIsingスピンを連続スピンに変換する方法を取り扱う。この変換だけ肉題かといえる訳ではないが、考えているモデルとそのモデルの相互作用の比によってこれらの基本的モデルに帰結されるので、肉題を整理し、物理的洞察を得ることになる。基本的モデルのいくつかは解かれているので、それらを使うことにより、その系の相転移の説明が可能になる。この方法は基底状態が並進対称性をもつ系に適用可能で、Isingスピンに限らない。その例として三角格子反強磁性のXYモデルへの適用も最後に取り上げる。

## §2 異方的三角格子反強磁性モデルと基本モデルへの変換

ハミルトニアンは、 $J_1, J_2, K_1, K_2 > 0$ として

$$H = J_1 \sum_{nn1} \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{nn2} \sigma_i \sigma_j - K_1 \sum_{nn1} \sigma_i \sigma_j - K_2 \sum_{nn2} \sigma_i \sigma_j \quad (1)$$

各項の相互作用は図1に示す通りである。基底状態は図2のよう、反強磁性(AF)、フェリ磁性(FR)、層状反強磁性(LAF)

図2

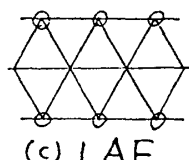
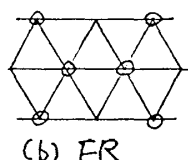
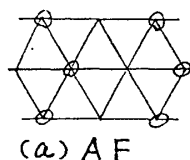
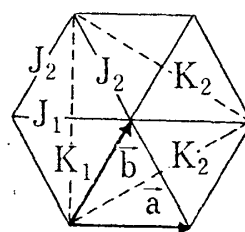


図1

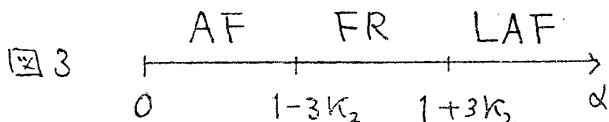


3つの型が存在する。縮退数は各々

4, 6, 2である。  $K_2 = K_2/J_1$  を固定すると,  $\alpha = J_2/J_1$  の変化に対する

相図は図3となる。  $K_1 = K_1/J_1$  には

依存しない。  $\alpha > 0$  の範囲では,  $K_2 > 1/3$  なら AF は存在しない。  $K_2 = 0$  では, FR の領域はない。

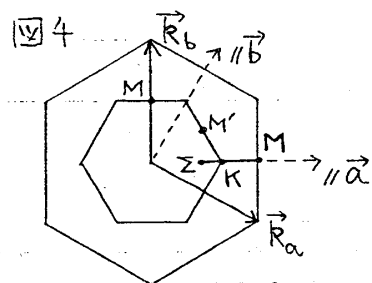


次に  $\sigma_i = \pm 1$  を連続スピンモデルに変換する。そのために  $1d/T$  に weight function 項  $\frac{1}{2} \alpha \sum \sigma_i^2 + \frac{1}{4} u \sum \sigma_i^4$  を加える。 (1) を波数ベクトル表示すれば,  $J_1 = 1$  として

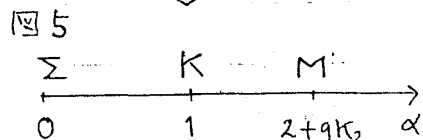
$$1d = \sum \hat{J}(k) \sigma_k \sigma_{-k} \quad (2)$$

$$\hat{J}(k) = \cos \vec{k} \cdot \vec{a} + \alpha [\cos \vec{k} \cdot \vec{b} + \cos \vec{k} \cdot (\vec{a} - \vec{b})] - K_1 \cos \vec{k} \cdot (\vec{a} - 2\vec{b}) - K_2 [\cos \vec{k} \cdot (\vec{a} + \vec{b}) + \cos \vec{k} \cdot (2\vec{a} - \vec{b})]$$

$\hat{J}(k)$  の最小値  $k=Q$  は図4で M 点から  $\Sigma$  点の太い実線と ( $k_b$  軸に対して) それと対称な線上にある。従って M 点を除けば, 常に2重に縮退している。最小値  $Q$  の  $\alpha (=J_2/J_1)$  依存性は定性的に図5の通り。  $\Sigma$  点に達するのは  $K_2 = 0$  のときのみ。



高温側の相転移はゆらぎが最大のモード  $Q_0$  と  $Q_Q$  によって支配される。このモードの周辺の, いわゆる長波長モードを, 文字通り長波長として扱うために 次の変換を行う。



$$\sigma_{q \pm Q} = \frac{1}{\sqrt{2}} (S_q^1 \pm i S_q^2) \quad (3)$$

この変換は各  $Q$  と  $-Q$  の近傍だけを考慮して,  $P$  点のまわりは残し, その他の領域は既にくりこまれているとする。そうすると, 連続スピンモデルのハミルトニアンは

$$\begin{aligned} 1d = & \frac{1}{2} \sum_i (r_0 + r_1) (S_i^1 S_{i+1}^1 + S_i^2 S_{i+1}^2) + \frac{1}{2} \sum_i (r_1 + r_2) \sigma_i \sigma_{i+1} \\ & + \frac{u}{4} \sum_i \dots \sum_{i_4} \delta(i_1 + \dots + i_4) \left[ \sigma_{i_1} \sigma_{i_2} \sigma_{i_3} \sigma_{i_4} + \frac{3}{2} \sigma_{i_1+Q} \sigma_{i_2+Q} \sigma_{i_3-Q} \sigma_{i_4-Q} \right] \\ & + \frac{3}{2} u \sum_{i_1} \sum_{i_2} \sum_{i_3} \sigma_{i_1} \sigma_{i_2} \sum_{\alpha=1}^2 S_{i_3}^\alpha S_{-i_1-i_2-i_3}^\alpha + R_4 \end{aligned} \quad (4)$$

但し,  $\sum_i$  は  $i=0$  近傍のみの和である。4次の残りの項  $R_4$  は,  $Q$  が  $K$  点 ( $\vec{k} = \vec{K}$ ) に近い場合には  $3\vec{K} = \vec{K}_R$  (逆格子ベクトル) になるので, Umklapp 項が存在する。

$$\begin{aligned} R_4^K &= u \sum_{i_1} \dots \sum_{i_4} \delta(i_1 + \dots + i_4 + 3\vec{Q} - 3\vec{K}) (\sigma_{i_1} \sigma_{i_2+Q} \sigma_{i_3+Q} \sigma_{i_4+Q} + c.c.) \\ &= 2u \sum_r \sigma_r' |\vec{S}_r|^3 \cos 3(\alpha_r + \vec{K} \cdot \vec{r}) \end{aligned} \quad (5)$$

そこで  $\vec{r} = \vec{R} - \vec{Q}$ 。上式では,  $q=0$  の近傍の限定された  $\pi-1/2$  変換

$$\sigma_r' = \frac{1}{\sqrt{N_r}} \sum_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \sigma_q \quad (6)$$

$$\sigma_{\vec{r}\pm\vec{Q}} \xrightarrow{FT} \frac{1}{\sqrt{2}} (S_r' \pm i S_r^2) = \frac{1}{2} S_r e^{i\theta_r} \quad (7)$$

を使, た。  $Q$  が  $M$  点に近い場合には,  $2\vec{M} = \vec{K}_R$  だから,  $\vec{r} = \vec{M} - \vec{Q}$  とし

$$R_4^M = 3u \sum_r (\sigma_r')^2 (S_r)^2 \cos 2(\theta_r + \vec{r} \cdot \vec{r}) \quad (8)$$

$Q$  が  $\Sigma$  点 ( $\vec{K} = \vec{\Sigma}$ ) に近い場合には,  $4\vec{\Sigma} = \vec{K}_R$  だから,  $\vec{r} = \vec{\Sigma} - \vec{Q}$  とし,

$$R_4^\Sigma = \frac{u}{8} \sum_r (S_r)^4 \cos 4(\theta_r + \vec{r} \cdot \vec{r}) \quad (9)$$

ハミルトニアン (4) も座標表示すると,  $\vec{S}_r = (S_r^1, S_r^2)$  とし

$$\begin{aligned} \bar{q} = & \frac{1}{2} \sum_r [v_0 \vec{S}_r^2 + (D \vec{S}_r)^2 + v_0' \sigma_r'^2 + c(D \sigma_r')^2] \\ & + \frac{u}{4} \sum_r \left\{ \sigma_r'^4 + 6 \sigma_r'^2 (\vec{S}_r)^2 + \frac{3}{2} (\vec{S}_r)^4 \right\} + R_4 \end{aligned} \quad (10)$$

そこで,  $v_0 = T - T_0$ ,  $v_0' = T - T_0'$  ( $T_0 > T_0'$ )。ハミルトニアン (10) は 3 成分のスピン系で, 磁気的異方性の項と基底状態の縮退を反映する  $R_4$  があり或る。

$Q$  が  $K$  点に近い場合には, (5) は  $\sigma_r'$  の反転を考慮すると  $\theta_r$  は 6 回回転対称性をもつ。 $Q=K$  ならば, その中の 1 つの状態にスピンがそろった (このとき  $\sigma_r'$  も (5) からわかるように誘起される), FR 状態になる。実際, FR 状態を作るには  $\vec{S}_{q=0}$  以外に  $\sigma_{q=0}$  が必要である。 $Q$  が  $M$  点に近ければ, (8) は 2 回対称性を持ち, LAF 状態を反映する。 $\Sigma$  点ならば, (9) は 4 回対称性を持ち, AF 状態に対応する。

$\Delta=0$  の場合には, José ら [1] によ, 2 研究された対称破り場中の XY モデルの問題となる。三角格子の場合については既に多くの研究がある [2]。

$\Delta \neq 0$  の場合はどうなるか。最近, Ostlund は非対称クランクモデル

$$\bar{q} = -J_0 \sum_{\langle ij \rangle} \cos \left( \frac{1}{p} 2\pi (n_i - n_j) + (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \vec{A} \right) \quad (11)$$

を調べた [3]。  $n_i$  は 0 から  $p-1$  の整数。 (10) は,  $T_0 \gg T_0'$  の場合には, (11) を連続体にしたモデル

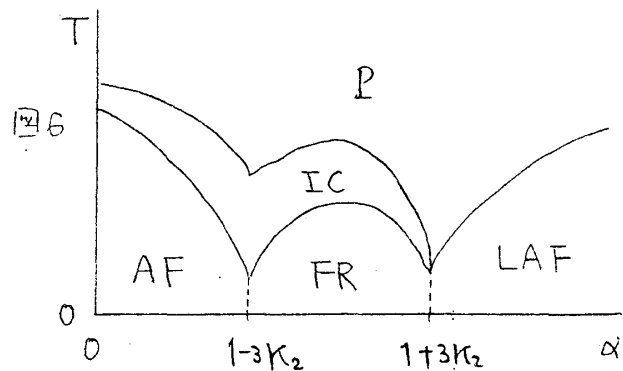
$$\bar{q}' = -J_0 \sum_{\langle rr' \rangle} \vec{S}_r \cdot \vec{S}_{r'} - h_p(\Delta) \sum_r \cos p(\theta_r + \vec{r} \cdot \vec{r}) \quad (12)$$

と等価である。 $Q$  が  $M, K, \Sigma$  に近い場合には,  $p$  は 2, 6, 4 となり,  $\Delta$  はそれぞれ  $M-Q, K-Q, \Sigma-Q$  となる。以下, Ostlund の結果を使い定性的にどんな相転移が起るかを論じる。

(12) を使う場合には,  $Q$  の範囲と  $p$  のとりうる値との関係を考える必要がある。

Qの位置の対称点の近さを、対称点における $\tilde{J}(k)$ の値との比較から、QとPの間隔を定性的に求めることは可能であるが、あいまいさが残る。しかし、先に触れたように $R_4$ 即ち $h_p$ の項は基底状態の反映であるから、Qではなく、直接に $\Delta (=J_2/J_1)$ とPの間隔を測ることも合理的である。したがって、図3からLAFでは $p=2$ , FRでは $p=6$ , AFでは $p=4$ となる。Ostlundの結果は、 $\Delta$ も0で $p > 2/2$ のときA相の下にfloating (IC) 相が存在し、低温ではLROをもった整合(C)相が現われる。 $p=3$ では $\Delta=\pi$ の近傍のみIC相があらわれるが、 $p \geq 4$ では常にIC相が存在する。このIC相は $\Delta=0$ ,  $2\pi$ ではKT相に接続する。なお、IC相はLROはないが、スピン間の相対的位相の平均値、即ち位相のヒューズが温度と $p$ と $\Delta$ に依存して決まる。それからの位相のずれの相関関数 $C(r) = \langle \exp[i(\phi(r) - \phi(0))] \rangle$ を考えれば( $\phi(r) = 2\pi n(r)/p - \bar{p} \cdot \bar{r}$  or  $p(\phi_r - \bar{p} \cdot \bar{r})$ ),  $C(r)$ は代数的に減少する(1-7)。

得られた大抵的な相図を図6に示す。各C相間の境界では不連続転移となる(点線)。その高温側の領域では、隣のC相の影響がないとしてIC相を決めた。しかし、より正確にはその影響を考慮する必要がある。LAFの領域は境界近傍でけずられ、代わりにIC相が高温側に張り出したり、AFとFRの境界の所では、IC相の領域が広がる可能性がある。



### §3. 2次元ANNNIモデル

これは正方格子における競合相互作用Isingモデルである。ハミルトニアンは、 $J, K > 0$ として

$$\begin{aligned}
 H &= -J \sum_{nn} \sigma_i \sigma_j + K \sum_{nnn \parallel x} \sigma_i \sigma_j \\
 &= \sum_k \left\{ -J(\cos k_x + \cos k_y) + K \cos 2k_x \right\} \sigma_k \sigma_{-k} \quad (13)
 \end{aligned}$$

$\tilde{J}(k)$ の最小点 $Q=(\pi, 0)$ は、 $\cos q_0 = J/4K$ で与えられ、2重に縮退している。 $\gamma \equiv K/J$ 。

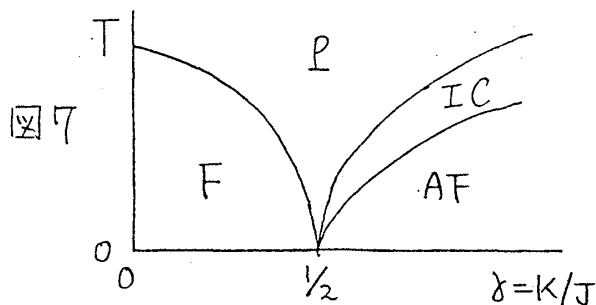
基底状態は $\gamma < 1/2$ で強磁性(F)で、 $\gamma > 1/2$ ではx方向に1次元の反強磁性(AF)である。 $\gamma = 1/2$ では無限個の縮退があるため、F相とAF相は $\gamma = 1/2$ の $T=0$ でのみ接する。

$\gamma < 1/4$ ではP相が調和項の最小点だから、2次Ising類の転移をみる。 $\gamma > 1/4$ では2つの最小点がP相に寄って対称なから、(3)の変換が使われる。連続スピンモデルのハミルトニアンは、(4) or (10)で与えられる。 $R_4$ については、 $\gamma > 1/2$ のとき $\vec{R} = (\pi/2 - q_0, 0)$ の(9)になる。しかし、 $1/2 > \gamma > 1/4$ では、 $R_4$ の項は存在しない。そのためにXYモデルそのものに見えるように見えるが、この場合には、 $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ を用いて(10)を書き直すと、次頁の(14)となる。即ち、 $\eta J_0$ の項とAの項の競合となる。 $\eta \equiv (T_0 - T_0')/T_0$ だから、 $1/2 > \gamma > 1/4$ では $\eta J_0$ の項が小さく、Ising的になり、

$$H = -J_0 \sum_r (\vec{S}_r)^2 + J_1 \sum_r [(S_r^x)^2 + (S_r^y)^2] + J_2 \sum_r (S_r^z)^2 \\ + J_3 \sum_r (S_r^z)^2 + A \sum_r [(\vec{S}_r)^2 - (S_r^z)^2]^2 \quad (14)$$

F相が生じる。他方,  $\delta > 1/2$  では  $J_0$  の項が大きく, XY 的になると考えられる。

結局, 図7の相図を得る。この結果は Villain-Bak の理論的結果 [5] と Sellars のモンテカルロの結果 [6] と一致する。しかし,  $1/4 < \delta < 1/2$  では, モデル(14) の厳密な結果が推測(図7)通りになりか  
どうかについては, モンテカルロと同様に  
また検討の余地がある。



#### §4 2次元ANNNIモデル

これはANNNIモデルを等方的にしたもの(4), (13)でy方向にも次隣接相互作用Kが存在する。基底状態は  $\delta = K/J > 1/2$  で縦, 横両方向 ↑↑↓↓ 変化するAF状態,  $\delta < 1/2$  ではF相となる。

$\vec{S}(k)$  の最小値は  $\pm \vec{Q}_1 = \pm(\pi_0, \pi_0)$ ,  $\pm \vec{Q}_2 = \pm(\pi_0, -\pi_0)$  の4つ。  $\epsilon = \cos^2 J/4K$ 。  
 $0 < \delta < 1/4$  では最小値はP点だけにあり, F相だけ出現する。  $\delta > 1/4$  では対称な2つの最小値があり, ハミルトニアンは2成分の2つのスピンを  $\vec{S}_q = (S_q^1, S_q^2)$  と  $\vec{T}_q = (T_q^1, T_q^2)$  で表わされる。(3)の変換を使うとハミルトニアンは, (10)で  $\vec{S}_r \rightarrow \vec{S}_r + \vec{T}_r$  とし,  $\frac{3}{4} \sum_r (\vec{S}_r)^2 (\vec{T}_r)^2$  を加えたものに等しい。  $R_4$  は  $\delta > 1/2$  で  $S_r$  と  $T_r$  に対し(9)と同じ4回対称の場合,  $\vec{Q}_1 = (\pi/2 - \pi_0, \pi/2 - \pi_0)$ ,  $\vec{Q}_2 = (\pi/2 - \pi_0, \pi/2 + \pi_0)$  となる。  
 $1/4 < \delta < 1/2$  では  $R_4$  は存在しない。

ANNNIモデルの場合と類似の議論が成り,  $\delta > 1/2$  では異方性の比較から  $S_r$  と  $T_r$  が  $\vec{S}_r$  に比べ優勢になる。また  $S_r$  と  $T_r$  については,  $(\vec{S}_r)^2 (\vec{T}_r)^2$  の異方性があるためにそのどちらが選択されるので, 結局2成分スピンを帰着される。そして  $R_4$  のためにANNNIモデルと同じになる。  
 $1/2 > \delta > 1/4$  では  $\vec{S}_r$  が優勢になり, Ising 相の転移を起す。結局定性的にANNNIモデルと同じ相図(図7)を得, モンテカルロの結果と一致する[4]。

#### §5 三角格子反強磁性XYモデル

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) \quad (15)$$

§2を参考にする,  $\vec{S}(k)$  の最小値はK点にある。各成分に変換(3)を使えば,  $\sigma_{i \pm a}^x$  は  $\vec{S}_i$  に,  $\sigma_{i \pm a}^y$  は  $\vec{T}_i$  に変換され, それらは4次の項  $\sum (\sigma_i^x)^2 (\sigma_i^y)^2$  によって結合している。(2)と  $\vec{T}_i + \vec{T}_r = \vec{T}_r e^{i\phi}$  を使うと, その結合項は

$$\frac{u}{2} \sum_r S_r^2 T_r^2 \cos 2(\theta_r - \phi_r) \xrightarrow{u \rightarrow \infty} \theta_r - \phi_r = \pm \pi/2 \quad (16)$$

となる。\$S\_r\$ と \$T\_r\$ に関して (5) の 6 回対称の場合が存在するが、上式を最小にする方が有利なから \$R\_r\$ は無視できる。 \$\theta\_r - \phi\_r = -\frac{\pi}{2} T\_r\$ (\$T\_r = \pm 1\$) とすれば、有効ハミルトニアンは

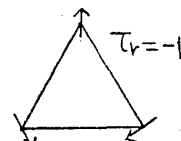
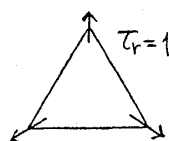
$$\overline{H} = -J_0 \sum_{\langle rr' \rangle} \cos(\theta_r - \theta_{r'}) (1 + T_r T_{r'}) \quad (17)$$

大雑把に言えば、\$S\_r\$ と \$T\_r\$ は三角形からなる block スピンで、各成分は 2 つの固有状態

\$e^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(2, -1, -1)\$, \$e^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 1, -1)\$ に対応する。即ち

\$\vec{S}\_r = \cos \theta\_r e^1 + \sin \theta\_r e^2\$。 \$\vec{T}\_r\$ についても同様。したがって (16) の関係は、\$\theta\_r = 0\$ とすれば、\$T\_r = \pm 1\$ に対して

\$\vec{S}\_r = e^1\$, \$\vec{T}\_r = \pm e^2\$ のようになる。この



chirality は Villain が odd モデルで導入したものの同一である [7]。ハミルトニアン (17)

では、Ising と XY 型の相転移が考えられる。 \$\langle T\_r T\_{r'} \rangle \simeq 1\$ とすれば、KT 転移が

\$T\_{KT} \simeq 2J\_0\$ で、 \$\langle \cos(\theta\_r - \theta\_{r'}) \rangle \simeq 1\$ とすれば、Ising の転移が \$T\_E \simeq 2.27J\_0\$ で生じる。

したがって定性的には Ising 転移をして KT 転移が続くだろう。これは宮下と斯波の最近のモンテカルロの結果 [8] と定性的に一致する。

## §6. まとめと議論

2次元競合相互作用モデルに対して、連続スピン変換を通じて、いわゆる長波長モードを中心とする表示を行い、基底状態の対称性が反映した基本モデルを導いた。これらの基本モデルは既に明らかになっていたり、あるいは見出しのよい、取扱い易い形をとつ。

Ising の場合、それは Ostlund のクローックモデル (or カワムラタの XY モデル) になることが多い。 \$F=0\$ が生じる場合のみ、異方性項によって XY 型から Ising 型になる。三角格子 XY モデルでは、chirality を表わす Ising 性と XY 性が独立に存在する。得られた相転移の定性的性質はほぼモンテカルロと一致し、この方法が極めて有効であることを示している。この方法は一般的だから、他のモデルに適用できる。

上に得られた結果の中で、C 相向に不連続性がある場合 (§2) には、その境界近傍で、IC 相がその影響を受けると考えられ、今後この点を検討する必要がある。

[1] J. José et al, Phys. Rev. B 16 (1977) 1217.

[2] H. Takayama et al, J. Phys. Soc. Jpn 52 (1983) 2888. と その中の文献.

[3] S. Ostlund, Phys. Rev. B 24 (1981) 398.

[4] W. Selke and M.E. Fisher, Z. Phys. B 40 (1980) 71.

[5] J. Villain and P. Bak, J. Phys. (Paris) 42 (1981) 657.

[6] P. Rujan, W. Selke and G.V. Uimin, Z. Phys. B 53 (1983) 221.

[7] J. Villain, J. Phys. C 10 (1977) 1717.

[8] S. Miyashita and H. Shiba, Tech. Rep. ISSP A (1983).